

рис.2. Рассчитанные зависимости минимального и максимального $\Gamma_{\text{eff}}^{\lambda_2}$ от $\Gamma_1^{\lambda_1}$ и $\Gamma_1^{\lambda_2}$. $\Gamma_2^{\lambda_1}$ – изменяющийся параметр, $\Gamma_3^{\lambda_1} = \Gamma_4^{\lambda_1} = 63,9^\circ$, φ_3 и φ_4 не зафиксированы, $\varphi_2 = 30^\circ$.

Список публикаций:

- [1] Jones R. C. // *J. Opt. Soc. Am.* 1941. Т. 31. № 7. С. 488–493.
- [2] Wu S. T., Efron U. and Hess L. D. // *Appl. Opt.* 1984. Т. 23. № 21. С. 3911–3915.
- [3] Darsht M. Y., Gol'tser I. V., Kundikova N. D. and Zel'dovich B. Y. // *Appl. Opt.* 1995. Т. 34. № 19. С. 3658–3661.

Теоретическое исследование спектральных характеристик

4,4'-дигидрокси-2,2-дифенилпропана

Бочарникова Елена Николаевна

Национальный исследовательский Томский государственный университет

Чайковская Ольга Николаевна

bocharnikova.2010@mail.ru

4,4'-дигидрокси-2,2-дифенилпропан (ВРА) широко используется при синтезе пластмасс (как ключевой мономер) и эпоксидных смол (в виде отвердителя). При попадании в живой организм обладает эндокринной активностью. Эстрогеноподобные свойства ВРА известны еще с 1936 года. В 1990-х годах прошлого века стало понятно, что ВРА может выделяться из поликарбонатного пластика в концентрациях, достаточных для повышения экспрессии рецепторов к прогестерону и активации рецепторов к эстрогенам. По определению Агентства по охране окружающей среды США эндокринные дисрапторы являются «экзогенными факторами, которые влияют на синтез, секрецию, транспорт, связывание, действие или элиминацию собственных гормонов в организме, которые отвечают за поддержание гомеостаза, размножение, развитие, и/или поведение». Эндокринные дисрапторы представляют собой гетерогенные группы молекул: природные вещества (фитоэстрогены сои, клевера и люцерны), фунгициды (винклозолин), химические промышленные вещества (полихлорированные бифенилы), металлы (свинец, ртуть, уран, кадмий, мышьяк и т.д.), пестициды (2,4-Д, ДДТ), пластификаторы (фталаты) и компоненты пластмасс. ВРА в настоящее время является одним из химических веществ с большим объемом производства - около 3 000 тонн в год по всему миру, а почти 100 тонн его выбрасывается ежегодно в окружающую среду. Структурная формула исследуемого соединения представлена на рис. 1.

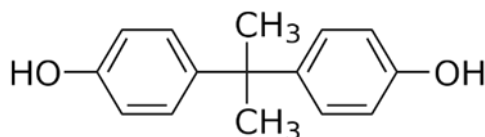


рис. 1. Структурная формула молекулы ВРА

Целью работы является исследование природы электронных состояний и каналов деградации энергии возбуждения в молекуле ВРА. Методами квантовой химии с использованием теории внутримолекулярных фотофизических процессов проведена интерпретация спектрально-люминесцентных свойств ВРА, установлены орбитальная природа фотодиссоциативных состояний и влияние энергии возбуждения на эффективность фотореакций.

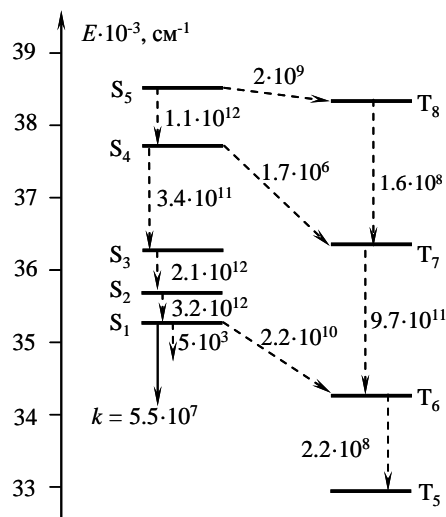


рис. 2. Энергетическая схема электронно-возбужденных состояний изолированной молекулы ВРА.

Квантово-химические алгоритмы и программы основаны на полупирическом методе частичного пренебрежения дифференциальным перекрытием со спектроскопической параметризацией (ЧПДП/С). Точные структурные параметры исследованной молекулы (длины связей, валентные и торсионные углы) не известны, поэтому геометрия молекулы в основном состоянии оптимизирована с помощью метода MM2 (Chem Office). Экспериментальные данные получены на спектрофотометре CM2203.

Анализ расчетов показал, что дезактивация энергии возбуждения в ВРА происходит по каналам внутренней и интеркомбинационной конверсий. Значение квантового выхода флуоресценции ВРА, полученное из расчета $\phi_f = 0.0025$ ($\phi_f = 0.0011$), связано с конкуренцией процессов интеркомбинационной конверсии и испускания. Рассчитанные константы фотофизических процессов, рассеяющих нижнее синглетное возбужденное состояние, равны: $k_f = 7 \times 10^7 \text{ c}^{-1}$ и $k_{ST} = 3 \times 10^{10} \text{ c}^{-1}$. В докладе обсуждается природа электронных возбужденных состояний ВРА.

Результаты были получены в рамках выполнения государственного задания Минобрнауки России.

Влияние технологии изготовления тонких пленок ZnO на внутренние механические напряжения

Выломов Леонид Павлович

Гавриляк Алина Маратовна, Лукашев Владимир Сергеевич

Белов Кирилл Николаевич

Южно-Уральский государственный университет

Подгорнов Федор Валерьевич, к.ф.-м.н.

leonvylomov@gmail.com

Оксид цинка ZnO является широкозонным полупроводником ($\Delta E_g = 3.37 \text{ эВ}$), обладающим одной из самых больших энергий связи экситонов ($\approx 60 \text{ мэВ}$), что делает перспективным его применение при создании компонентной базы электроники, в частности, ультрафиолетовых светодиодов.

В настоящее время известно несколько технологий изготовления тонких пленок оксида цинка, самой доступной из которых является оксидирование тонких пленок цинка, нанесенных на подложку. Одной из проблем, возникающих при использовании данной технологии, является возникновение внутрипленочных механических напряжений приводящих к изменению параметров и свойств пленок оксида цинка. Наиболее эффективным методом оценки величины механических напряжений и их пространственного распределения является спектроскопия комбинационного рассеяния света.

Целью данной работы является оценка влияния температуры стеклянной подложки при нанесении пленок цинка на величину механических напряжений в пленках ZnO методом комбинационного рассеяния.

Данный метод основан на том, что разность характерных частот спектральных линий $\Delta\omega$ в спектре комбинационного рассеяния линейно зависит от механического напряжения (σ):

$$\Delta\omega = k\sigma, \quad (1)$$

где k – коэффициент пропорциональности.

В рамках данной работы исследовались пленки ZnO (толщина 40 нм), полученные окислением пленок цинка, изготовленные электроно-лучевым методом при разных температурах стеклянных подложек (при температуре подложки 28°C и 100°C во время изготовления), исследование проведено на спектрометре комбинационного рассеяния света NT-MDT Integra Spectra на длине волны возбуждающего излучения 472,8 нм.

Спектры исследуемых тонких пленок ZnO имеет только один пик, максимум которого расположен около 444 см^{-1} , что соответствует вкладу атома кислорода. Наблюдается смещение спектрального положения